

要約

本論文は、分子スケールにおける液体界面の高速破裂現象の解明を目的とし、自由液膜破裂、液柱後退と固体基板上の液膜撥水の3つの系において、分子運動論を用いた発熱現象における温度上昇値の導出や分子動力学法を用いた数値シミュレーションの2つの手法から迫り、破裂の動力学や発熱過程における温度上昇の影響に関する一連の研究成果をまとめたものである。本論文は、以下の7章で構成されている。

第1章は序論であり、液体の高速破裂現象に関する研究の意義について述べている。まず、液体界面の高速変形現象に関する数多の具体例を提示し、産業的応用や理学的意義に関して述べる。次に、液膜破裂に関する液体の粘性・粘弾性、固体基板上の液膜撥水、数値計算などの研究結果に関する歴史的背景を時系列に沿って述べる。最後に、本論文の構成とそれぞれの節が明らかにする領域を明確化し、研究目的について述べる。

第2章では、界面とバルク領域の液体分子を完全に二分する物理モデルを提案し、液体の高速破裂現象における発熱に伴う温度上昇値を算出している。まず、自由液膜破裂や液柱後退を代表例として、気液系におけるエネルギー保存則を基に熱散逸による温度上昇値を算出している。ここで、気体分子運動論による理想気体の議論だけでなく、分子間力を考慮した実在流体における寄与を示している。さらに、自由度の高い多原子分子における温度上昇値を算出できる一般化を行い、汎用性の高い予測式を構築している。そして、本論文で提案する物理モデルを Dupré の式や Young の式に応用して固体基板上の液膜撥水や毛管上昇の固液気系に拡張し、濡れ性の寄与を明らかにしている。

第3章は、本研究の数値計算で用いている分子動力学法に関して記述している。数値計算で用いる分子間ポテンシャル、計算方法、温度の定義、制御方法や境界条件について述べる。そして、本研究で用いる Lenard-Jones 流体の温度依存性やカットオフ依存性に関して説明し、数値計算の妥当性に関して述べている。

第4章は、分子動力学法による自由液膜破裂の数値計算結果に関して記述している。アルゴンを模擬した単原子分子を用いて、分子スケール厚みを有する液膜の破裂速度が Taylor-Culick 速度と一致することを初めて確認している。さらに、破裂過程における液膜内部の温度上昇を初めて検出し、熱エネルギー生成の存在を明らかにしている。そして、破裂液膜端部近傍における特徴的な温度上昇値と第2章で導出した予測式との一致を確認し、液膜破裂に伴う温度上昇による物性値の変化が破裂挙動に及ぼす影響を明らかにしている。

第5章では、分子動力学法を用いた液柱後退現象の数値計算結果に関して記述している。第4章と同様に液体内部で温度上昇を確認し、第2章における予測

式の妥当性を確認している．また，特徴的時間を用いて本計算結果における時系列情報を無次元化し，液柱端部後退の動力学が慣性力支配型であることを初めて明らかにしている．さらに，液柱後退における予測速度が数値計算結果と定量的に一致することを初めて確認し，第4章の自由液膜破裂の計算結果と比較することで，界面の曲率が破裂現象に及ぼす影響を明らかにしている．

第6章では，分子動力学法を用いた固体基板上の液膜撥水の数値計算結果に関して記述している．破裂液膜内部で温度上昇を確認し，第2章におけるモデルの妥当性を確認している．また，液膜の撥水過程において，液膜内部の速度境界層における散逸を仮定とした粘慣性型撥水を初めて確認している．さらに，慣性支配領域において経験的に用いられてきた撥水速度の予測値に，濡れ性が及ぼす影響を明らかにしている．

第7章は，本論文の総論であり，得られた研究成果について要約している．

液体の破裂現象は，不安定性やカスケード現象などの理学的興味や，燃料噴射器から食品科学におけるフォーム生成などの産業的な応用例に至るまでの広範囲な環境で観察される．特に分子スケールの系では，破裂により期待される温度上昇値は数 K 程度になり，自由表面上におけるマランゴニ効果や温度依存性の高い物性値の変化を誘発し，液膜破裂の動的挙動を複雑化させることが考えられる．そのため，本論文で得られた発熱による温度上昇を考慮した高速な流体挙動の理解は，ナノテクノロジーにおける等温プロセスやナノスケール下の流体制御の実現に役立つものであると考えられる．